



TITLE:

シフト線形方程式に対するリスタート付きShifted Krylov部分空間法について (科学技術計算における理論と応用の新展開)

AUTHOR(S):

今倉, 暁; 曾我部, 知広; 張, 紹良

CITATION:

今倉, 暁 ...[et al]. シフト線形方程式に対するリスタート付きShifted Krylov部分空間法について (科学技術計算における理論と応用の新展開). 数理解析研究所講究録 2012, 1791: 47-56

ISSUE DATE:

2012-04

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/172840>

RIGHT:

シフト線形方程式に対する リスタート付き Shifted Krylov 部分空間法について

今倉 暁*, 曾我部 知広†, 張 紹良‡
* 筑波大学, † 愛知県立大学, ‡ 名古屋大学

On Restarted Shifted Krylov Subspace Methods for Solving Shifted Linear Systems

Akira Imakura*, Tomohiro Sogabe† and Shao-Liang Zhang‡

*University of Tsukuba, †Aichi Prefectural University, ‡Nagoya University

E-mail: imakura@ccs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本論文では, 右辺ベクトル $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ が等しく, 係数行列がそれぞれ $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ および $\hat{A} := A + \sigma I, \sigma \in \mathbb{R}$ である以下の 2 つの線形方程式

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad \hat{A}\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{b} \quad (1)$$

を数値的に解くことを考える. ここで, 係数行列 A および \hat{A} は共に非対称かつ正則であるとする. 本論文では, 前者を seed 方程式, 後者を add 方程式と呼ぶ. シフト線形方程式 (1) は格子量子色力学 (Lattice QCD), 大規模電子構造計算, 制御理論, また行列関数の計算や固有値問題に対する射影法の部分問題としてなど様々な分野で現れ, 効率的な数値解法の開発が望まれている.

シフト線形方程式 (1) を解く最も単純な方法として, seed 方程式および add 方程式それぞれに対して, 独立に (前処理付き) Krylov 部分空間法を適用することである. 有効な前処理を構築することができれば, 各方程式を効率的に解くことができる. しかしながら, 有効な前処理は方程式毎に異なる点に注意する必要がある.

一方異なるアプローチとして, seed 方程式と add 方程式を同時に解く Shifted Krylov 部分空間法と呼ばれる解法が近年注目されている. 詳細は第 2 節で述べるが, Shifted Krylov 部分空間法は, Krylov 部分空間のシフト普遍性: 初期ベクトルが共線であれば, 行列 A および \hat{A} に対する Krylov 部分空間はシフト σ によらず等しい, という特徴に基づく解法である.

Krylov 部分空間法の計算コストの主要部は Krylov 部分空間の基底ベクトルの生成である. Krylov 部分空間のシフト普遍性は, Krylov 部分空間の基底ベクトルを再利用することにより, シフト線形方程式 (1) の効率的な求解を可能とする. これまでに, Shifted CG 法 [5], Shifted QMR 法 [6], Shifted GMRES 法 [2], Shifted Bi-CGSTAB(l) 法 [7], Shifted IDR(s) 法 [3] など様々な解法が提案されている. 詳細は文献 [16] を参照されたい.

GMRES 法 [14] や FOM 法 [12] に代表される Arnoldi 原理に基づく Krylov 部分空間法は, 長い漸化式を持ち, 反復回数の増加に伴って反復当たりの演算量および記憶容量が増

大する。このため、実用上の観点から“リスタート”が適用される [13]。同様の理由から、Shifted GMRES 法などの Arnoldi 原理に基づく Shifted Krylov 部分空間法に対してもリスタートを適用することが望まれる。しかしながら、初期残差ベクトルが共線であったとしても、一般に、Krylov 部分空間法で得られた残差ベクトルは共線とはならない。このため、一般には、Shifted Krylov 部分空間法に対してはリスタートが適用できない。

この問題点を解決する方法として、Frommer と Glässner は Shifted GMRES 法へのリスタートの適用を可能とした Restarted Shifted GMRES 法 [8] を提案した。本論文では、Frommer と Glässner のアイディアに基づき、リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法の一般形を示す。また、Restarted Shifted GMRES 法の問題点を示し、リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法に対する新しい最小残差条件を提案する。

本論文は以下のように構成される。第 2 節で、Shifted Krylov 部分空間法の概略について記す。第 3 節では、Shifted GMRES 法へのリスタートの適用を可能とした Restarted Shifted GMRES 法の基本的なアイディアについて紹介し、リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法の一般形を示す。また、第 4 節において、Restarted Shifted GMRES 法の問題点を示し、リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法に対する新しい最小残差条件を提案する。最後に第 5 節でまとめと今後の課題を述べる。

2 Shifted Krylov 部分空間法

$\mathcal{K}_k(A, \mathbf{u})$ を行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ およびベクトル $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ により定義される Krylov 部分空間 $\mathcal{K}_k(A, \mathbf{u}) := \text{span}\{\mathbf{u}, A\mathbf{u}, A^2\mathbf{u}, \dots, A^{k-1}\mathbf{u}\}$ であるとする。この時、ベクトル $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ が共線 ($\mathbf{v} = c\mathbf{w}, c \in \mathbb{R}$) であるならば、任意の $\sigma \in \mathbb{R}$ に対し、

$$\mathcal{K}_k(A, \mathbf{v}) = \mathcal{K}_k(A + \sigma I, \mathbf{w}) \quad (2)$$

が成り立つ。これを、Krylov 部分空間のシフト不変性と呼ぶ [16]。

シフト線形方程式 (1) に対する Shifted Krylov 部分空間法の基本的アイディアは、seed 方程式を解くために構築した Krylov 部分空間を、Krylov 部分空間のシフト不変性 (2) に基づき、add 方程式に対しても再利用することである。

各方程式に対する初期近似解を $\mathbf{x}_0, \hat{\mathbf{x}}_0$ 、対応する初期残差を $\mathbf{r}_0 := \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0, \hat{\mathbf{r}}_0 := \mathbf{b} - \hat{A}\hat{\mathbf{x}}_0$ と置く。この時、初期残差 $\mathbf{r}_0, \hat{\mathbf{r}}_0$ が互いに共線であったとすると ($\hat{\mathbf{r}}_0 = \gamma_0 \mathbf{r}_0, \gamma_0 \in \mathbb{R}$)^{†1}、Krylov 部分空間のシフト不変性 (2) より、 k 反復目の近似解 $\mathbf{x}_k, \hat{\mathbf{x}}_k$ は、 $\mathcal{K}_k(A, \mathbf{r}_0)$ の基底ベクトルを列に持つ $n \times k$ 行列 V_k を用い、それぞれ

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + V_k \mathbf{y}_k, \quad \hat{\mathbf{x}}_k = \hat{\mathbf{x}}_0 + V_k \hat{\mathbf{y}}_k$$

のように表わされる。ここで、 $\mathbf{y}_k, \hat{\mathbf{y}}_k \in \mathbb{R}^k$ である。

線形方程式に対する Krylov 部分空間法と同様に、これまでに基底ベクトルの生成アルゴリズムおよびベクトル $\mathbf{y}_k, \hat{\mathbf{y}}_k$ を設定するための条件等により様々な解法が提案されている。詳細は文献 [16] を参照されたい。

^{†1}これは、例えば $\mathbf{x}_0 = \hat{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{0}$ と置くことにより実現できる。この時 $\mathbf{r}_0 = \hat{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{b}, \gamma_0 = 1$ である。

3 リスタート付き Shifted Krylov 部分空間法

Arnoldi 原理に基づく Krylov 部分空間法は長い漸化式を持つため、反復回数の増加に伴い 1 反復当たりの演算量および記憶容量が増大する。このため、Arnoldi 原理に基づく Krylov 部分空間法を線形方程式に適用する場合、一般的にリスタートが用いられる。

シフト線形方程式 (1) に対して Arnoldi 原理に基づく Krylov 部分空間法を適用する際も同様であり、実用上の観点からリスタートを使用することが望まれる。しかしながら、初期残差 $\mathbf{r}_0, \hat{\mathbf{r}}_0$ が共線であったとしても、Krylov 部分空間法で得られる残差

$$\mathbf{r}_k := \mathbf{r}_0 - AV_k \mathbf{y}_k, \quad \hat{\mathbf{r}}_k := \hat{\mathbf{r}}_0 - \hat{A}V_k \hat{\mathbf{y}}_k$$

は一般に共線にはならない。このため、一度リスタートを行うと、それ以降の反復においては Krylov 部分空間のシフト不変性 (2) を利用できない。

以下では、この問題点を解決する方法として、Shifted GMRES 法へのリスタートの適用を可能とした、Restarted Shifted GMRES 法の概略を記し、リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法の一般形を示す。

3.1 Restarted Shifted GMRES 法

GMRES 法の自然な拡張である Shifted GMRES 法では、ベクトル $\mathbf{y}_k, \hat{\mathbf{y}}_k$ は GMRES 法と同様に共に最小残差条件に基づき

$$\mathbf{y}_k = \arg \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^k} \|\beta \mathbf{e}_1 - H_k^* \mathbf{y}\|_2, \quad (3)$$

$$\hat{\mathbf{y}}_k = \arg \min_{\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^k} \|\beta \gamma_0 \mathbf{e}_1 - \hat{H}_k^* \hat{\mathbf{y}}\|_2 \quad (4)$$

のように設定される。ここで、 H_k^*, \hat{H}_k^* は Arnoldi 原理の行列表現

$$AV_k = V_{k+1} H_k^*, \quad \hat{A}V_k = V_{k+1} \hat{H}_k^* \quad (5)$$

により得られる $(k+1) \times k$ 上ヘッセンベルグ行列であり、

$$\hat{H}_k^* = H_k^* + \sigma \begin{bmatrix} I \\ \mathbf{0}^T \end{bmatrix}$$

を満たす。また、 $\beta = \|\mathbf{r}_0\|_2, \mathbf{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^{k+1}$ である。

Frommer と Glässner は、上記の Shifted GMRES 法に対しリスタートの適用を可能とするため、seed 方程式に対しては GMRES 法と同様に最小残差条件 (3) を課す一方で、add 方程式に対しては、最小残差条件 (4) に代わり、共線性条件

$$\hat{\mathbf{r}}_m = \gamma_m \mathbf{r}_m, \quad \gamma_m \in \mathbb{R} \quad (6)$$

を課するというアイディアを提案した。

m 反復の GMRES 法で得られる seed 方程式の残差ベクトル \mathbf{r}_m は,

$$\mathbf{r}_m = V_{m+1}\mathbf{u}_{m+1}, \quad \mathbf{u}_{m+1} := \beta\mathbf{e}_1 - H_m^*\mathbf{y}_m \in \mathbb{R}^{m+1} \quad (7)$$

のように表現できる. この時, 共線性条件 (6) および Arnoldi 原理の行列表現 (5) から,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}}_m = \gamma_m \mathbf{r}_m & \Leftrightarrow \mathbf{b} - \hat{A}(\hat{\mathbf{x}}_0 + V_m \hat{\mathbf{y}}_m) = \gamma_m V_{m+1} \mathbf{u}_{m+1} \\ & \Leftrightarrow \hat{\mathbf{r}}_0 - \hat{A} V_m \hat{\mathbf{y}}_m = V_{m+1} \mathbf{u}_{m+1} \gamma_m \\ & \Leftrightarrow \gamma_0 \mathbf{r}_0 - V_{m+1} \hat{H}_m^* \hat{\mathbf{y}}_m = V_{m+1} \mathbf{u}_{m+1} \gamma_m \\ & \Leftrightarrow V_{m+1} (\hat{H}_m^* \hat{\mathbf{y}}_m + \mathbf{u}_{m+1} \gamma_m) = \gamma_0 \mathbf{r}_0 \\ & \Leftrightarrow \hat{H}_m^* \hat{\mathbf{y}}_m + \mathbf{u}_{m+1} \gamma_m = \gamma_0 \beta \mathbf{e}_1 \end{aligned}$$

の関係式が成り立つ. 従って, 共線性条件 (6) を満たす $\hat{\mathbf{y}}_m$ および γ_m は $(m+1) \times (m+1)$ 上ヘッセンベルグ行列を係数に持つ線形方程式

$$\left[\begin{array}{c|c} \hat{H}_m^* & \mathbf{u}_{m+1} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \hat{\mathbf{y}}_m \\ \gamma_m \end{array} \right] = \gamma_0 \beta \mathbf{e}_1 \quad (8)$$

の解として得られる^{†2}. Restarted Shifted GMRES 法のアルゴリズムは Algorithm 1 のように表される.

3.2 リスタート付き Shifted Krylov 部分空間法の一般形

add 方程式に対して共線性条件 (6) を課すことでリスタートを可能にするという Frommer と Glässner のアイディアは, seed 方程式の残差ベクトル \mathbf{r}_m が式 (7) のように表現できることに基づく. この表現は, GMRES 法に限らず, Arnoldi 原理に基づく任意の Krylov 部分空間法で可能である. このため, Frommer と Glässner のアイディアに基づき, リスタート付き Shifted Krylov 部分空間法の一般形は Algorithm 2 のように表現できる^{†3}.

一方, Simoncini は, $\mathbf{y}_m, \hat{\mathbf{y}}_m$ をともに Ritz-Galerkin 条件に基づき構築することで, 得られる残差 $\mathbf{r}_m, \hat{\mathbf{r}}_m$ が共線となる点に着目し, 陽的に共線性条件を課す必要のない Restarted Shifted FOM 法 [15] を提案した. ここで, Restarted Shifted FOM 法は陽的には共線性条件を課していないものの, Algorithm 2, Step 3において, seed 方程式に対して m 反復の FOM 法を適用する解法と同値である点に注意する.

^{†2}seed 方程式に対する m 反復の GMRES 法の残差多項式を $P_m(\lambda)$ とする ($\mathbf{r}_m = P_m(A)\mathbf{r}_0$). この時, 方程式 (8) の係数行列が正則となるための必要十分条件は, $P_m(-\sigma) \neq 0$ である [8, Lemma 2.4].

^{†3}Restarted Shifted GMRES 法と同様に, 方程式 (8) の係数行列が正則となるための必要十分条件は, seed 方程式に対する m 反復の Krylov 部分空間法の残差多項式 $P_m(\lambda)$ が $P_m(-\sigma) \neq 0$ を満たすことである.

Algorithm 1 Restarted Shifted GMRES method

-
- 1: Choose the restart frequency m and the initial guesses $\mathbf{x}_0, \hat{\mathbf{x}}_0$ such that $\hat{\mathbf{r}}_0 = \gamma_0 \mathbf{r}_0$, e.g., $\mathbf{x}_0 = \hat{\mathbf{x}}_0 = \mathbf{0}$
 - 2: Set $\beta = \|\mathbf{r}_0\|_2, \mathbf{v}_1 = \mathbf{r}_0/\beta$
 - 3: **for** $j = 1, 2, \dots, m$, **do**:
 - 4: Compute $\mathbf{w}_j = A\mathbf{v}_j$
 - 5: **for** $i = 1, 2, \dots, j$, **do**:
 - 6: $h_{i,j} = (\mathbf{w}_j, \mathbf{v}_i)$
 - 7: $\mathbf{w}_j = \mathbf{w}_j - h_{i,j}\mathbf{v}_i$
 - 8: **end for**
 - 9: $h_{j+1,j} = \|\mathbf{w}_j\|_2$
 - 10: $\mathbf{v}_{j+1} = \mathbf{w}_j/h_{j+1,j}$
 - 11: **end for**
 - 12: Define the $(m+1) \times m$ Hessenberg matrix $H_m^* = \{h_{i,j}\}_{1 \leq i \leq m+1, 1 \leq j \leq m}$
 - 13: Compute $\mathbf{y}_m = \arg \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{C}^m} \|\beta \mathbf{e}_1 - H_m^* \mathbf{y}\|_2$ and set $\mathbf{u}_{m+1} = \beta \mathbf{e}_1 - H_m^* \mathbf{y}_m$
 - 14: Solve $\begin{bmatrix} \hat{H}_m^* \\ \mathbf{u}_{m+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}}_m \\ \gamma_m \end{bmatrix} = \gamma_0 \beta \mathbf{e}_1$
 - 15: $\mathbf{x}_m = \mathbf{x}_0 + V_m \mathbf{y}_m, \hat{\mathbf{x}}_m = \hat{\mathbf{x}}_0 + V_m \hat{\mathbf{y}}_m, \mathbf{r}_m = \mathbf{r}_0 - AV_m \mathbf{y}_m, \hat{\mathbf{r}}_m = \hat{\mathbf{r}}_0 - \hat{A}V_m \hat{\mathbf{y}}_m$
 - 16: Update $\mathbf{x}_0 := \mathbf{x}_m, \hat{\mathbf{x}}_0 := \hat{\mathbf{x}}_m, \mathbf{r}_0 := \mathbf{r}_m, \hat{\mathbf{r}}_0 := \hat{\mathbf{r}}_m, \gamma_0 := \gamma_m$, and go to 2
-

Algorithm 2 General form of the restarted shifted Krylov subspace method

-
- 1: Choose the restart frequency m and the initial guesses $\mathbf{x}_0^{(1)}, \hat{\mathbf{x}}_0^{(1)}$ such that $\hat{\mathbf{r}}_0^{(1)} = \gamma_0^{(1)} \mathbf{r}_0^{(1)}$, e.g., $\mathbf{x}_0^{(1)} = \hat{\mathbf{x}}_0^{(1)} = \mathbf{0}$
 - 2: **for** $l = 1, 2, \dots$, until convergence **do**:
 - 3: Solve (approximately) the seed system by m iterations of Krylov subspace method with the initial guess $\mathbf{x}_0^{(l)}$, and get the approximate solution $\mathbf{x}_m^{(l)} = \mathbf{x}_0^{(l)} + V_m^{(l)} \mathbf{y}_m^{(l)}$
 - 4: Compute $\hat{\mathbf{x}}_m^{(l)} = \hat{\mathbf{x}}_0^{(l)} + V_m^{(l)} \hat{\mathbf{y}}_m^{(l)}$ and $\gamma_m^{(l)}$ by eq. (8)
 - 5: Update $\mathbf{x}_0^{(l+1)} := \mathbf{x}_m^{(l)}, \hat{\mathbf{x}}_0^{(l+1)} := \hat{\mathbf{x}}_m^{(l)}$ and $\gamma_0^{(l+1)} := \gamma_m^{(l)}$
 - 6: **end for**
-

4 リスタート付き Shifted Krylov 部分空間法に対する新しい最小残差条件

第3節に示したように、リスタート付き Shifted Krylov 部分空間法の一般形は Algorithm 2 のように表される。このため、解法を設計するための自由度は、Step 3 において seed 方程式に対してどのような Krylov 部分空間法を適用するかのみである。これまでに、seed 方程式に対して GMRES 法や FOM 法およびそれらの改良法などの既存の Krylov 部分空間法を適用するにより、いくつかのリスタート付き Shifted Krylov 部分空間法が提案されてきた [1, 8–11, 15].

本節では, seed 方程式に対して最小残差条件に基づく GMRES 法を適用した Restarted Shifted GMRES 法の問題点を示し, リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法のための新しい最小残差条件を提案する.

4.1 Restarted Shifted GMRES 法の問題点

Restarted Shifted GMRES 法は seed 方程式に対しては最小残差条件 (3) を, add 方程式に対しては共線性条件 (6) を課した解法である. ここで, Restarted Shifted GMRES 法の収束性に関し, 以下の定理が成り立つ [8, Theorem 3.3].

定理 1 対象のシフト線形方程式 (1) が

$$\begin{cases} \cdot \text{ 係数行列 } A \text{ が正定値 : } ((Ax, x) > 0, \quad \forall x \neq 0) \\ \cdot \sigma > 0 \end{cases} \quad (9)$$

を満たすとする. この時, Restarted Shifted GMRES 法は任意のリスタート周期 m に対して収束する. また, add 方程式の解は常に存在し, 任意の反復回数 k および任意のリスタートサイクル l に対して,

$$\|\hat{r}_k^{(l)}\|_2 \leq |\gamma_0^{(l)}| \|\mathbf{r}_k^{(l)}\|_2$$

が成り立つ.

一般に, 第 1 リスタートサイクルにおける初期近似解は $\mathbf{x}_0^{(1)} = \hat{\mathbf{x}}_0^{(1)} = \mathbf{0}$ と設定するため, $\gamma_0^{(1)} = 1$ である. この時, 任意の反復回数 k および任意のリスタートサイクル l に対して

$$|\gamma_k^{(l)}| \leq |\gamma_0^{(l)}| \leq 1$$

が満たされる. 従って, 定理 1 は, 条件 (9) を満たす問題に対して add 方程式が seed 方程式より速く収束することを意味する.

Fig. 1 (a), (b) にそれぞれ条件 (9) を満たす問題, 満たさない問題に対する Restarted Shifted GMRES 法の収束履歴を示す. Fig. 1 に示されるように, Restarted Shifted GMRES 法は, 条件 (9) を満たす問題に対しては安定した収束性を示すものの; Fig. 1 (a) 参照, 条件 (9) を満たさない問題に対しては, リスタート毎に seed 方程式の切り替えを行ったとしても^{†4}, 収束が不安定になる場合がある; Fig. 1 (b) 参照.

このように, Restarted Shifted GMRES 法は, GMRES(m) 法をシフト線形方程式に対して拡張した解法であり, 最小残差条件に基づくものの, 条件 (9) を満たさない問題に対しては必ずしも安定した収束性を示さない. この点が Restarted Shifted GMRES 法の問題点として挙げられる.

^{†4}文献 [4] において, リスタート毎に収束の遅い方程式に seed を変更することで収束性を改善できることが示唆されている.

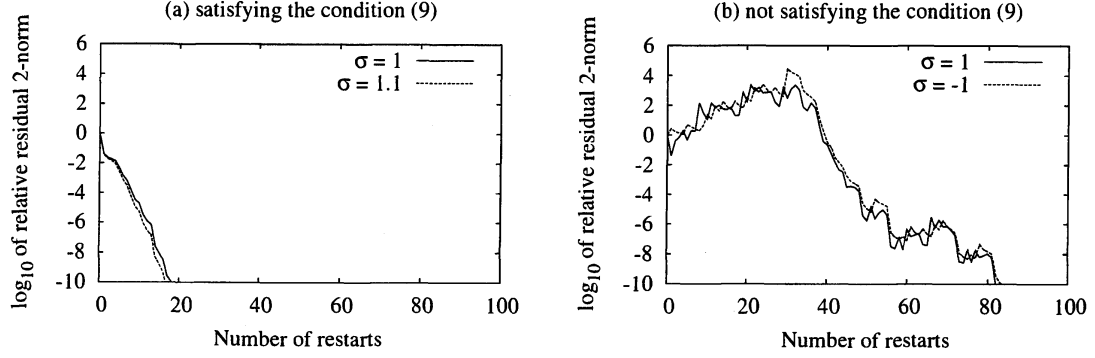


Fig. 1: Relative residual 2-norm histories of the Restarted Shifted GMRES method for shifted linear systems: (a) satisfying the condition (9); and (b) not satisfying the condition (9).

4.2 新しい最小残差条件およびその定式化

Restarted Shifted GMRES 法の seed 方程式に課される最小残差条件 (3) は, seed 方程式の残差ノルム $\|\mathbf{r}_m\|_2$ を最小化しており, seed 方程式に対しては (残差ノルムの意味で) 最適な決定法である. しかしながら, その決定に際し add 方程式の収束性を考慮しておらず, add 方程式に対しては必ずしも適切な決定法であるとは言えない. この点が Restarted Shifted GMRES 法の収束の不安定性の要因であると考えられる.

この問題点を解決するため, 本論文では, 各方程式の残差ノルム $\|\mathbf{r}_m\|_2, \|\hat{\mathbf{r}}_m\|_2$ を考慮した最小残差条件

$$\min_{\mathbf{y}_m \in \mathbb{R}^m} \|\mathbf{r}_m^{\text{shift}}\|_\infty, \quad \mathbf{r}_m^{\text{shift}} := [\|\mathbf{r}_m\|_2, \|\hat{\mathbf{r}}_m\|_2]^T \quad (10)$$

を提案する. ここで, seed 方程式の残差 \mathbf{r}_m と add 方程式の残差 $\hat{\mathbf{r}}_m$ が共線性条件 (6) に基づき一対一に対応するため, 残差ノルム $\|\mathbf{r}_m^{\text{shift}}\|_\infty$ はベクトル \mathbf{y}_m にのみ依存する点に注意する.

共線性条件 (6) より, 残差ノルム $\|\mathbf{r}_m^{\text{shift}}\|_\infty$ は

$$\begin{aligned} \|\mathbf{r}_m^{\text{shift}}\|_\infty &= \max\{\|\mathbf{r}_m\|_2, \|\hat{\mathbf{r}}_m\|_2\} \\ &= \|\beta \mathbf{e}_1 - H_m^* \mathbf{y}_m\|_2 \max\{1, |\gamma_m|\} \end{aligned}$$

と表されるため, 新しい最小残差条件 (10) は

$$\mathbf{y}_m := \arg \min_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m} \|\beta \mathbf{e}_1 - H_m^* \mathbf{y}\|_2 \max\{1, |\gamma|\} \quad (11)$$

と表現される. ここで, γ は

$$\begin{bmatrix} \hat{H}_m^* & \beta \mathbf{e}_1 - H_m^* \mathbf{y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{y}} \\ \gamma \end{bmatrix} = \gamma_0 \beta \mathbf{e}_1$$

の解として得られる。このため、GMRES 法や Restarted Shifted GMRES 法で課される通常の最小残差条件が m 次の線形最小化問題 (3) として定式化されるのに対し、新しい最小残差条件 (10) は m 次の非線形最小化問題 (11) として定式化される。

新しい最小残差条件 (10) を課したリスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法は、従来の Restarted Shifted GMRES 法と異なり、各方程式の残差を考慮した残差ノルム $\|r_m^{\text{shift}}\|_\infty$ の単調減少性が保証される。このため、線形方程式に対する GMRES(m) 法と同様に優れた安定性を持つことが期待される。

なお、新しい最小残差条件 (10) は、条件 (9) を満たす問題に対しては従来の最小残差条件 (3) と同値であることを付記する。

4.3 新しい最小残差条件の収束特性

モデル問題として、 $A \in \mathbb{R}^{100 \times 100}$ を上二重対角行列 (対角成分 = $[0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 10, 11, \dots, 105]$, 副対角成分 = $[1, 1, \dots, 1]$) とした以下のシフト線形方程式

$$(A + \sigma_1 I)x(\sigma_1) = b, \quad (A + \sigma_2 I)x(\sigma_2) = b \quad (12)$$

を考える。ここで、 $b = [1, 1, \dots, 1]^T$, $\sigma_1 = 1, \sigma_2 = -1$ であるとする。なお、このモデル問題 (12) は条件 (9) を満たさず、Restarted Shifted GMRES 法の収束が不安定となる例として文献 [15] で紹介されている問題である。

モデル問題 (12) に対して、初期近似解を $x_0^{(1)}(\sigma_1) = x_0^{(1)}(\sigma_2) = 0$, リスタート周期を $m = 10$ とした Restarted Shifted GMRES 法および新しい最小残差条件 (11) を課したリスタート付き Shifted Krylov 部分空間法を適用し、その収束性を比較する。なお、 m 次元非線形最小化問題 (11) は、 $\|r_m^{\text{shift}}\|_\infty \leq \|r_0^{\text{shift}}\|_\infty$ を保証した上で反復法を用い近似的に計算した。

両解法の収束履歴を Fig. 2 に示す。Fig. 2 太線に示されるように、新しい最小残差条件を課した提案法は、 $\|r_m^{\text{shift}}\|_\infty$ の単調減少性を保証することにより、従来の Restarted Shifted GMRES 法 (Fig. 2 細線) と比較して安定した収束性を示すことがわかる。しかしながら、提案法の残差ノルムは $\approx 10^{-9}$ 程度で停滞しており、必ずしも高速化にはつながないことがわかる。

5 まとめ

本論文では、Frommer と Glässner のアイディアに基づき、リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法の一般形を示した。また、Restarted Shifted GMRES 法の問題点を示し、リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法に対する新しい最小残差条件を提案した。

数値実験から、新しい最小残差条件をリスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法に適用した場合、残差ノルム $\|r_m^{\text{shift}}\|_\infty$ の単調減少性を保証することで残差の収束性を安定化させるという結果が得られた。しかしながら、残差ノルムは停滞してしまい必ずしも高

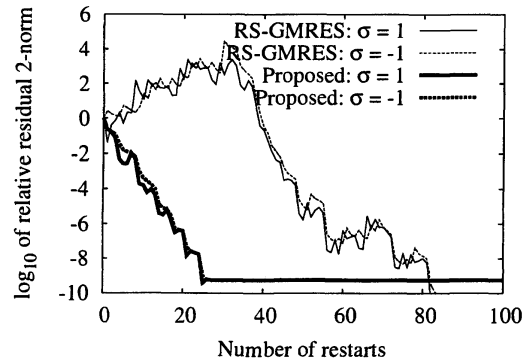


Fig. 2: Relative residual 2-norm histories of the Restarted Shifted GMRES method and proposed method for the model systems (12).

速化にはつながっていないのが現状である。今後の課題としては、非線形最小化問題 (11) の求解法に関する考察および収束性に関する理論解析が挙げられる。

また一方で、seed 方程式に対して最小残差条件 (3) を課し、add 方程式に対しては共線性条件 (6) を課するという Frommer と Glässner のアイディアは、リスタート付きの Shifted Krylov 部分空間法だけでなく、Shifted Bi-CGSTAB(l) 法や Shifted IDR(s) 法などの短い漸化式を持つ解法に対しても、主に収束の安定化のために採用されている。これらの解法に対しても新しい最小残差条件を適用し、有効性を検証することも今後の課題として挙げられる。

謝辞

本研究はHPCI戦略プログラム 分野5「物質と宇宙の起源と構造」の援助を受けた。

参考文献

- [1] D. Darnell, R. B. Morgan and W. Wilcox, Deflated GMRES for systems with multiple shifts and multiple right-hand sides, *Linear Algebra Appl.*, 429(2008), 2415–2434.
- [2] B. N. Datta and Y. Saad, Arnoldi methods for large Sylvester-like observer matrix equations, and an associated algorithm for partial spectrum assignment, *Linear Algebra Appl.*, 154–156(1991), 225–244.
- [3] L. Du, T. Sogabe and S.-L. Zhang, IDR(s) for solving shifted linear systems, 第40回 数値解析シンポジウム 講演予稿集, 2011, 95–98.
- [4] A. Feriani, F. Perotti and V. Simoncini, Iterative system solvers for the frequency analysis of linear mechanical systems, *Comput. Method. Appl. M.*, 190(2000), 1719–1739.

- [5] R. W. Freund, On conjugate gradient type methods and polynomial preconditioners for a class of complex non-Hermitian matrices, *Numer. Math.*, 57(1990), 285–312.
- [6] R. W. Freund, Solution of shifted linear systems by quasi-minimal residual iterations, *Numerical Linear Algebra*, L. Reichel, A. Ruttan and R. S. Varga (eds.), W. de Gruyter, 1993, 101–121.
- [7] A. Frommer, BiCGSTAB(l) for families of shifted linear systems, *Computing*, 70(2003), 87–109.
- [8] A. Frommer and U. Glässner, Restarted GMRES for shifted linear systems, *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(1998), 15–26.
- [9] G. D. Gu, J. Zhang and Z. Li, Restarted GMRES augmented with eigenvectors for shifted linear systems, *Int. J. Comput. Math.*, 80(2003), 1037–1047.
- [10] Y.-F. Jing and T.-Z. Huang, Restarted weighted full orthogonalization method for shifted linear systems, *Comput. Math. Appl.*, 57(2009), 1583–1591.
- [11] Z. Li and G. D. Gu, Restarted FOM augmented with Ritz vectors for shifted linear systems, *Numer. Math. J. Chinese Univ. (English Ser.)*, 15(2006), 40–49.
- [12] Y. Saad, Krylov subspace methods for solving large unsymmetric linear systems, *Math. Comput.*, 37(1981), 105–126.
- [13] Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2nd ed., SIAM, Philadelphia, 2003.
- [14] Y. Saad and M. H. Schultz, GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 7(1986), 856–869.
- [15] V. Simoncini, Restarted full orthogonalization method for shifted linear systems, *BIT Numer. Math.*, 43(2003), 459–466.
- [16] 曾我部 知広, 張 紹良, 大規模シフト線形方程式の数値解法 – クリロフ部分空間のシフト不変性に着目して, *応用数理*, 19(2009), 163–178.